



TITLE:

HOPG基板上における分子配列のモデリング

AUTHOR(S):

前田, 尚生

CITATION:

前田, 尚生. HOPG基板上における分子配列のモデリング. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2016, 2015: 47-47

ISSUE DATE:

2016-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/214369>

RIGHT:

HOPG 基板上における分子配列のモデリング

Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 前田 尚生

固液界面において機能性分子を配列させる試みは、分子エレクトロニクス観点から近年非常に大きな注目を集めている。形成した配列は走査型トンネル顕微鏡 (STM) を用いて単一分子レベルの分解能で観測することができる。本研究では、フォトクロミック分子であるジアリールエテンを用いてその配列パターンおよび光応答性の検討を行うことを目的とした。

本研究で用いたジアリールエテン誘導体は、HOPG 基板と高い親和性をもつ長鎖アルキル鎖と、水素結合ネットワークを形成するアミド基を分子の両端に有している。3-チエニル型ジアリールエテンの閉環体 **1** はオクタン酸/HOPG 界面上で安定な二次元分子配列を形成したのに対し、2-チエニル型ジアリールエテンの閉環体 **2** は配列を形成しなかった (Figure 1a,d)。この原因を考察するために、Materials Studio を用いた MM/MD 計算によるシミュレーションを行った。計算結果から、**2** は **1** に比べて HOPG 基板との接触が不十分であり、基板によって得られるファンデルワールス力が **1** よりも小さいことが明らかとなった (Figure 1b,e)。また、基板上で平面的な構造をとるための歪みエネルギーを求めたところ、**2** のほうが **1** よりも大きな値をとることがわかり、**2** は基板に吸着するために大きく歪む必要があることが示唆された (Figure 1c,f)。これらのことから、**2** は基板上で安定な二次元配列を形成できなかったのだと考えられる。本研究ではさらに、光異性化反応に由来する 2 つの異性体がほぼ等しい濃度で協同的に分子配列を形成することを利用して、異なる 3 種類の配列状態を光照射で可逆に変換する過程を STM で観測することにも成功した。

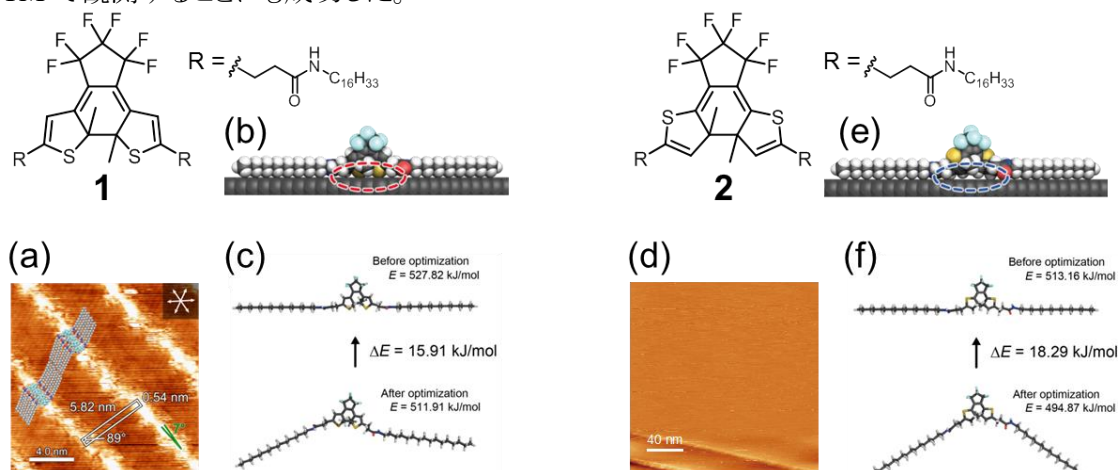


Figure 1. (a) STM image of **1**. (b) Optimized structures of **1** on HOPG substrate modeled by MM calculations. (c) Structures of **1** before and after optimization by MM calculations in gas phase. (d) STM image of **2**. (e) Optimized structures of **2** on HOPG substrate modeled by MM calculations. (f) Structures of **2** before and after optimization by MM calculations in gas phase.

Reference: Soichi Yokoyama, Takashi Hirose, Kenji Matsuda, *Chem. Commun.* **2014**, 50, 5964-5966.